САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Физический факультет
Кафедра физики высоких энергий и элементарных частиц

Гулицкий Николай Михайлович

История решения модели Изинга

Реферат по истории и философии науки

Научный руководитель: Н.В. Антонов
д. ф.-м. н., проф.

Санкт-Петербург
2012

Оглавление

Глава 1

Введение

Многие из физико-химических систем допускают рассмотрение в виде решеточных моделей с взаимодействием между ближайшими соседями. Наиболее простой и поэтому распространенной является модель Изинга, предложенная Вильгельмом Ленцем в 1920 и впервые решенная Эрнстом Изингом в 1925 году.

В реферате рассмотрены основные свойства и этапы решения модели Изинга, включая ранние приближенные методы решения, точное решения Онзагера двумерной модели Изинга, а также широко применяющийся для решения разнообразных решеточных моделей матричный метод вычисления сингулярностей термодинамических и магнитных свойств системы вблизи критической точки.

При подготовке реферата использовались монографии А.Н. Васильева [1] и М. Фишера [2], книга Ф. Дайсона, Э. Монтролла, М. Каца и М. Фишера [3], а также статья Г. Браша, опубликованная в Reviews of Modern Physics [4].

В разделе 2.1 описаны экспериментальные предпосылки, давшие толчок развитию теории критических явлений.

В разделе 2.2 описана история возникновения и развития теории критических явлений, одной из моделей которой и является модель Изинга.

В разделе 2.3 дана сводка моделей, описывающих статистическое поведение многочастичных систем. Такие модели условно делятся на два класса – физические (см. 2.3.1) и математические (см. 2.3.2), что в данном случае равнозначно наличию некоторых дополнительных допущений, благодаря которым такие модели и могут быть в некоторых ситуациях точно решены.

Раздел 2.4 полностью посвящен модели Изинга – как самой модели и ее точному решению, так и истории ее развития.

В разделе 2.5 вкратце изложен достаточно простой матричный метод решения решеточных моделей, применяющийся как для решения модели Изинга, так и для других, более сложных систем.

Глава 2

Теория критических явлений

2.1 Экспериментальные предпосылки

Для реальных систем, обладающих большим числом степеней свободы, характерны два замечательных равновесных свойства: высокая степень упорядочения при низких температурах и внезапность исчезновения или появления дальнего порядка при фазовых переходах.

Фазовый переход представляет собой макроскопическое проявление молекулярного движения, при котором система, состоящая из огромного числа взаимодействующих частиц, подвергается резкой внутренней перестройке при незначительных изменениях внешних условий. Такая перестройка может происходить только благодаря коллективности молекулярного движения. Сложность теоретического описания фазовых переходов связана не с самой постановкой задачи, а с непосредственным вычислением статсуммы, однако несмотря на это интерес к данным задачам не ослабевает, в частности из-за наличия большого количества достаточно точных экспериментов.

Одним из первых таких экспериментов было измерение теплоемкости жидкого He^4 вблизи λ-точки, проведенное Бакингемом, Фейербенком и Келлерсом (БФК). Наблюдаемое изменение теплоемкости He^4 с температурой вблизи λ-точки может быть с большой точностью описано эмпирической формулой с особенностью логарифмического типа.

Экспериментальная установка, которая позволила провести такие точные измерения, включает медный сосуд, обладающий высокой теплопроводностью, наполненный жидкостью. При этом гелий находится на расстоянии не больше $0,007$ см от поверхности меди, что гарантирует специально выбранная ребристая форма внутренней поверхности сосуда.

Обычно при измерениях теплоемкости в большом объеме жидкости трудно добиться быстрого установления равновесия в связи с ростом флуктуации при приближении к критической точке. В эксперименте БФК используется очень малый объем гелия, а высокая теплопроводность меди способствует сравнительно быстрому выравниванию флуктуации. Теплоемкость гелия вблизи λ-точки очень велика и при приближении к точке перехода резко изменяется, в то время как теплоемкость меди при низкой температуре перехода $(2,17\ \mathrm{K})$ практически равна нулю и очень мало меняется в пределах нескольких десятых градуса. Поэтому для проведения эксперимента достаточно малого количества гелия.

Поскольку температура перехода жидкость – газ для гелия при критической плотности равна $5,2$ K, можно использовать метод БФК для определения температурной зависимости теплоемкости гелия при критической плотности вблизи точки перехода жидкость – газ. Такая работа была выполнена Молдовером и Литтлом в Стэнфордском университете. В этом случае также теплоемкость вблизи критической точки оказалась логарифмической функцией температуры.

Такой же метод использовали Воронель и др. для изучения температурной зависимости теплоемкости аргона вблизи критической точки при объеме, равном критическому. В результате этих экспериментов тоже была обнаружена логарифмическая особенность теплоемкости вблизи критической точки $(150,5\ \mathrm{K})$. Аналогичные, но менее точные результаты были получены для кислорода.

Прекрасные данные, полученные Фридбергом и др. для теплоемкости антиферромагнитных солей также свидетельствуют о логарифмической особенности теплоемкости вблизи антиферромагнитной критической точки.

Весьма примечательно, что во всех случаях точное измерение теплоемкости привело к логарифмической особенности. Вопрос о том, универсален ли этот результат, т. е. зависит ли он от закона взаимодействия между молекулами, является фундаментальным вопросом теории фазовых переходов. Интересно отметить, что единственный имеющийся строгий теоретический расчет теплоемкости системы взаимодействующих частиц – результат Онзагера для двумерной изинговской модели ферромагнетика – также приводит к логарифмической особенности. Определенные закономерности проявляются также в уравнении состояния жидкостей. В 1945 г. Гуггенгейм обработал лучшие из имеющихся в то время экспериментальных данных по определению формы огибающей двухфазной области. Из данных для Ne, Ar, Kr, Xe, N_2, O_2, CO и CH_4 следовало, что

$$\rho_L - \rho_G \approx A(T_c - T)^{1/3}$$

(ρ_L и ρ_G – плотности жидкости и газа на границе двухфазной области) и что для этих веществ справедлив “закон прямолинейного диаметра”:

$$\frac{1}{2}(\rho_L + \rho_G) = \rho_G \left(1 + \alpha \frac{T_c - T}{T_c}\right),$$

где $\alpha = 2,5$.

Точные эксперименты на ксеноне, выполненные в 1952 г. Вайнбергером и Шнайдером, подтверждают закон $1/3$. Вопрос об универсальности этого закона был поднят Эдвардсом, который считал, что для He^4 лучше пользоваться предложенной Бакингемом формулой

$$\frac{\chi^2}{1+\ln\chi} = a(T_c - T),$$

где

$$\chi = \frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_L + \rho_G}.$$

Для ферромагнетиков роль уравнения состояния играет температурная зависимость спонтанной намагниченности. Наилучшее согласие с экспериментальными данными для непроводящих ферромагнетиков EuS и $CrBr_3$ дает зависимость

$$\frac{M(T)}{M(O)_{H\to 0}} \propto \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\beta},$$

и вблизи критической точки $\beta = 0,33 \pm 0,01$ для EuS и $\beta = 0,365 \pm 0,015$ для $CrBr_3$.

Для ферромагнетиков и жидкостей можно сравнить еще два критических индекса, характеризующих поведение магнитной восприимчивости и сжимаемости жидкости. Если приближаться к критической температуре T_c со стороны высоких температур, то магнитная восприимчивость

$$\chi_0 = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{H\to 0}$$

обладает особенностью типа

$$\chi_0 = \frac{C}{\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\gamma}}.$$

Из экспериментов по рассеянию нейтронов Якрот нашел, что для железа $\gamma = 1,3$, в то время как Ноукс и Эррот, непосредственно измеряя восприимчивость, получили $\gamma = 1,37 \pm 0,04$. Кувел и Фишер тщательно проверили старые экспериментальные данные Вейсса и Форрера по никелю и нашли, что $\gamma = 1,35 \pm 0,02$. Грэхем для гадолиния нашел $\gamma = 1,3$. Для кобальта значение $\gamma = 1,21 \pm 0,04$, полученное Грэхемом, по-видимому, несколько меньше, чем для железа и никеля. Как мы увидим ниже, в модели Изинга $\gamma = 1,25$. Бейкер и др. показали недавно, что в модели Гейзенберга $\gamma = 1,43$.

Изотермическая сжимаемость жидкости

$$\beta = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_T$$

является аналогом величины χ_0 для ферромагнетика. Экспериментальные данные для жидкостей вблизи критической точки хуже приведенных выше данных для χ_0, так что критический индекс γ в данном случае не так хорошо известен.

2.2 Теория критических явлений

Теория Ван-дер-Ваальса была первой статистико-механической теорией фазовых переходов; по существу теория спонтанной намагниченности Кюри — Вейсса и теория фазовых переходов в бинарных сплавах Брэгга — Вильямса математически эквивалентны теории Ван-дер-Ваальса. В основе теорий Ван-дер-Ваальса и Кюри — Вейсса лежало предположение о слабости и дальнодействующем характере сил притяжения. В течении долгого времени эти теории полностью оправдывали себя, однако с появлением точного решения двумерной модели Изинга пришлось от них отказаться – самым сильным возражением против этих теорий оказался тот факт, что в точном решении была получена логарифмическая особенность в выражении для теплоемкости, в то время как теории, основанные на предположении о слабых дальнодействующих силах, предсказывали скачок теплоемкости.

Существование критической точки открыл в 1869 году Эндрюс в опытах с CO_2 ($T_c = 304K$) – ранее считалось, что некоторые газы вообще не поддаются сжижению давлением. Через четыре года Ван-дер-Ваальс в своей докторской диссертации предложил общеизвестное теперь уравнение состояния реального газа, создав тем самым исторически первую теорию самосогласованного поля. Аналогичную теорию ферромагнетизма построил в 1907 году Пьер Вейсс. Впоследствии открывались все новые фазовые переходы, создавались модели для их описания, поэтому появилась естественная потребность в систематизации накопившегося материала. В 1933 году Эренфест предложил классификацию фазовых переходов. Сейчас она представляется неточной, и практически используется лишь основное деление на переходы первого рода с конечным скачком параметра порядка (намагниченности ферромагнетика, плотности для перехода газ-жидкость и т.п.) и переходы второго рода, для которых эта величина непрерывна. В пространстве D всех внешних параметров, задающих состояние системы, особые точки, в которых происходит переход первого рода, образуют некоторое многообразие M меньшей размерности (например, если D двумерно, то M – одномерная линия сосуществования фаз). При плавном изменении внешних параметров представляющая состояние системы точка движется по некоторой траектории в D; если в некоторой точке x траектория пересекает многообразие M, то в момент пересечения происходит переход первого рода с конечным скачком параметра порядка. Величина скачка зависит от положения x внутри M и стремится к нулю при стремлении x к некоторым граничным точкам многообразия M, такие точки называют критическими. Если траектория, приходя из области неособых точек, попадает в критическую точку x_c и затем идет по многообразию M, то говорят, что в момент прохода через x_c в системе происходит фазовый переход второго рода. Обычно это наблюдается при понижении температуры, поэтому часто используют выражения “выше T_c”, “ниже T_c” и “в T_c” как синонимы терминов “до перехода”, “после перехода” и “в момент перехода” = “в критической точке”.

Если M – одномерная линия сосуществования фаз, то критической является обычно точка ее окончания. Но это не общий случай: например, для бозе-газа пространство D четырехмерно (температура, давление и комплексное внешнее поле, термодинамически сопряженное с параметром порядка), многообразие M – двумерная область на плоскости температура - давление при нулевом внешнем поле, ее граница образует целую линию критических точек. Поэтому при понижении температуры фазовый переход второго рода в сверхтекучее состояние жидкого гелия происходит не при определенном значении давления, как для обычного перехода газ - жидкость, а при любом его значении в некотором интервале.

Из эксперимента известно, что при подходе к критической точке восприимчивость системы неограниченно возрастает, имеются также аномалии теплоемкости и других величин. Исследование этих "критических явлений" и составляет предмет теории критического поведения.

Одной из важнейших его особенностей является универсальность: различные системы демонстрируют приблизительно одинаковое критическое поведение, например, восприимчивость магнетика расходится при $T \to T_c$ приблизительно так же, как сжимаемость газа, спонтанная намагниченность ведет себя подобно разности плотностей жидкости и газа на кривой сосуществования и т.п. Это привело к появлению понятия класса универсальности, объединяющего системы с одинаковым критическим поведением. По современным представлениям последнее определяется лишь общими свойствами системы: размерностью пространства, природой (числом компонент, тензорными свойствами и т.п.) параметра порядка, симметрией задачи и общим характером взаимодействия (дальнодействие или короткодействие), но не зависит от его деталей.

Единая теория критического поведения, естественно объясняющая универсальность, была сформулирована Ландау в 1937 году. В ней постулируется, что равновесное значение α_0 параметра порядка α можно находить из условия минимума свободной энергии F, рассматриваемой как функционал от α и прочих переменных, задающих состояние системы. Вторым постулатом является предположение об аналитичности F в окрестности критической точки по всем переменным. Поскольку их отклонения от критических значений всегда можно считать малыми (непрерывность), в тэйлоровском разложении F по отклонениям нужно удерживать лишь небольшое (но достаточное для объяснения самого факта перехода) число первых членов. В итоге явный вид F для заданного набора переменных и заданной симметрии определяется практически однозначно, чем и объясняется универсальность.

Теория Ландау дает вполне определенные предсказания относительно сингулярностей различных величин в критической точке: для простейшего перехода второго рода в магнетике или в системе газ - жидкость она предсказывает конечный скачок теплоемкости, особенность вида $|T - T_c|^{-1}$ для восприимчивости (сжимаемости) и $(T_c - T)^{1/2}$ для спонтанной намагниченности (разности плотностей $\Delta\rho$ жидкости и газа на кривой сосуществования фаз). Но впоследствии стало ясно, что эти предсказания неточны: из выполненного Онзагером в 1942 г. (и опубликованного в 1944 г.) точного расчета статсуммы двумерной модели Изинга в нулевом внешнем поле следует, что теплоемкость в данной модели имеет логарифмическую особенность вместо конечного скачка; в 1943 г. Гугенгейм в экспериментах с несколькими газами подтвердил степенной закон $\Delta\rho \propto (T_c - T)^{\beta}$, но с показателем $\beta = 1/3$ вместо $1/2$ по теории

Ландау.

Интенсивное экспериментальное и теоретическое исследование критических сингулярностей началось в шестидесятых годах. Довольно скоро утвердилось мнение, что в подавляющем большинстве случаев сингулярности действительно степенные, но показатели степеней, называемые теперь критическими индексами или критическими показателями, отличаются от канонических значений, предсказываемых теорией Ландау.

Очень важную роль в создании современной теории критического поведения сыграла модель Изинга. Это простейшая модель одноосного классического ферромагнетика с обменным взаимодействием соседних спинов, расположенных в узлах заданной пространственной решетки. Она используется также и для других систем, в частности, решеточного газа и бинарных сплавов. Правильнее было бы называть ее моделью Ленца-Изинга, поскольку предложил ее Вильгельм Ленц в 1920 году, а его ученик Эрнст Изинг в 1925 году сумел найти точное решение для одномерной цепочки спинов. Он был разочарован, не обнаружив в решении фазового перехода при конечной температуре. Изинг счел это органическим дефектом модели, так сначала думали и другие (например, Гайзенберг при построении своей квантовой модели ферромагнетизма указывал на то, что классическая модель Изинга не объясняет фазового перехода). И лишь позднее стало ясно, что дело не в самой модели, а в одномерности решенной Изингом задачи; в 1936 году Пайерлс привел общеизвестные сейчас аргументы, доказывающие невозможность фазового перехода в одномерных системах с короткодействием.

Первую точную информацию о фазовом переходе в модели Изинга получили в 1941 году Крамере и Ванье, сумевшие из соображений симметрии найти точное значение T_c для двумерной квадратной решетки Изинга, а 28 февраля 1942 года на заседании N.Y.Acad. of Sci. Ларс Онзагер предъявил свое знаменитое точное решение двумерной модели – статсумму в нулевом внешнем поле. Детали расчета были опубликованы лишь через два года. Впоследствии он вычислил спонтанную намагниченность в той же модели, приведя результат в процессе дискуссии на конференции по фазовым переходам в Корнелльском университете в августе 1948 года. Формула для спонтанной намагниченности была потом опубликована им без вывода в. Ее вывод Онзагер так никогда и не опубликовал, и лишь четыре года спустя Янг сумел найти свое решение задачи, приведя полный расчет спонтанной намагниченности. Онзагер использовал матричный метод, предложенный ранее в работах. Кауфман усовершенствовала этот метод, что позволило ей вычислить и парную корреляционную функцию спинов в нулевом поле.

Этим исчерпываются точные результаты для модели Изинга, все они относятся к двумерной модели в нулевом внешнем поле. Впоследствии они неоднократно воспроизводились различными техническими методами, но никаких точных результатов для трехмерной модели и даже для двумерной с внешним полем получить не удалось. Тем не менее, критическое поведение трехмерной модели Изинга считается сейчас достаточно хорошо известным благодаря разработке эффективных методов экстраполяции высоко- и низкотемпературных разложений. Техника построения таких разложений известна давно, но эффективное их использование для анализа критических сингулярностей требует знания достаточно длинных отрезков рядов и стало возможным лишь в конце пятидесятых годов с появлением мощных компьютеров. На этом пути удалось получить достаточно надежные и точные оценки критических температур и индексов для различных пространственных решеток. В некотором смысле эти результаты даже ценнее экспериментальных, поскольку они относятся к точно определенной модели, а в реальных экспериментах отклонения от теоретических предсказаний всегда можно приписать влиянию примесей, неучтенных взаимодействий и т.п. Существенную информацию о критическом поведении дают также машинные расчеты методом Монте-Карло.

Результаты численных расчетов в трехмерной модели Изинга сыграли очень важную роль. Во-первых, они наглядно подтвердили идею универсальности: для разных решеток (простая кубическая, объемноцентрированная, гранецентрированная и др.) полученные значения критических температур оказались существенно различными, а критические индексы – одинаковыми, но при этом иными, чем в двумерной модели. Во-вторых, именно анализ полученных значений индексов подсказал идею критического скейлинга (или гипотезы подобия), лежащую в основе современной теории.

2.3 Модели статистических систем

2.3.1 Физические модели

Классический континуальный газ

Эта модель обычно включает в себя три гипотезы:

а) применимость классической механики,

б) парный характер сил взаимодействия,

в) центральные силы.

Действительно, использование классической механики кажется вполне допустимым для большинства газов вблизи их критических температур. Только в случае водорода, гелия и, может быть, неона должны быть сделаны серьезные оговорки.

Квантовомеханический расчет сил взаимодействия между атомами и молекулами в проблеме многих частиц показал, что гипотеза (б) не совсем корректна. Однако, за исключением очень плотных сред, тройные (и более высокого порядка) силы взаимодействия малы, и, видимому, в первом приближении ими можно пренебречь вблизи критических плотностей (ρ_c обычно порядка $1/3$ от ρ_{max}).

Гипотеза (в) о центральном характере сил с потенциалом $\phi(r)$ была бы вполне правильной для одноатомных газов. Вероятно, она менее точна для двухатомных и более сложных молекул, однако закон соответственных состояний убедительно показывает, что это несущественно при рассмотрении критических явлений.

Известно, что правильный парный потенциал $\phi(r)$ должен иметь область сильного отталкивания, затем неглубокую потенциальную яму и, наконец, область притяжения, убывающего как $1/r^6$. Однако для теоретических целей часто рассматривают потенциал лишь в ограниченной области ($\phi(r) \equiv 0$ при $r > b$), считая, что такое предположение не сильно влияет на результат.

Рассматривая $\phi(r)$ как "эффективный потенциал взаимодействия" между молекулами одного сорта и пренебрегая взаимодействием с молекулами другого сорта, мы можем, таким образом, использовать эту модель при рассмотрении бинарных растворов.

Гейзенберговская модель магнетизма

Здесь принципиально важным является предположение, что:

а) спины локализованы.

Считается, что спины могут быть с хорошим приближением локализованы на решетке магнитных ионов, так что каждое значение спиновой переменной S_j отвечает j-му узлу в решетке. Это оправдано для непроводящих кристаллов, но не очевидно в случае хороших проводников типа железа и никеля – действительно, для последних измерение магнитного насыщения при нулевой температуре показывает, что на каждый ион приходится только $0,6$ обычного электронного магнитного момента.

Принимая гипотезу (а), запишем полный гейзенберговский гамильтониан для N ионов:

$$H = -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} J_{ij}\mathbf{S_i}\mathbf{S_j} - g\beta_B \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S_i}\mathbf{H},$$

где $\mathbf{H}$ – магнитное поле, $g\beta_B$ – магннитный момент спина и $J_{ij} = J(\mathbf{r_{ij}})$ – "обменная энергия" между i- и j-спинами (J положительна для ферромагнетика и отрицательна для антиферромагнетика).

Такой гамильтониан содержит в себе дальнейшие допущения модели:

б) парные взаимодействия;

в) полная изотропность, т. е. H инвариантно при вращении полного спина.

Все реальные магнитные вещества обладают некоторой анизотропией. Хотя эта анизотропия чаще всего количественно весьма мала, она может играть важную роль, особенно в антиферромагнетиках при "установлении" направления оси намагничивания. Ее можно учесть, добавив в H члены вида $\sum(S_l^z)^2$, т. е. заменив $\mathbf{J_{ij}}\mathbf{S_i}\mathbf{S_j}$ на $\sum_{\alpha,\beta}\mathbf{J_{ij}^{\alpha,\beta}}\mathbf{S_i^{\alpha}}\mathbf{S_j^{\beta}}$ (где $\alpha,\ \beta = x,\ y,\ x$), или добавляя дипольные силы вида $(\mathbf{S_i}\mathbf{S_j} - \mathbf{3}(\mathbf{S_i}\cdot\mathbf{r_{ij}})(\mathbf{S_j}\cdot\mathbf{r_{ij}}))/r_{ij}^3$. Однако в большинстве случаев мы допускаем, что эти тонкости несущественны. Кроме того, можно еще больше упростить H, если ограничиться взаимодействием ближайших соседей, которое описывается только одной обменной константой J. Имеются достаточные основания считать, что взаимодействия вторых и более далеких соседей в общем случае не пренебрежимо малы, но не должны играть слишком большой роли, если только они не нарушают характер упорядочения, определяемый взаимодействиями ближайших соседей. Когда же это не так, может наблюдаться более сложное магнитное поведение, которое обычно не обсуждается. Существует еще одна “довольно реальная” модель:

Бинарные сплавы

Предполагается, что:

а) существует жесткая решетка, каждый узел которой занят атомом сорта A или B;

б) учитываются только взаимодействия ближайших соседей с энергиями ε_{AA}, $\varepsilon_{AB} = \varepsilon_{BA}$ и ε_{BB} (хотя можно рассмотреть и более далекие взаимодействия).

Гипотезы (а) и (б) означают пренебрежение любыми взаимодействиями с колебаниями решетки. Это не очень корректно, так как если массы m_A и m_B различны, то даже энергия нулевых колебаний решетки зависит от степени упорядоченности. Однако, если ε не слишком сильно зависит от величины “постоянной решетки” и массы отличаются незначительно, колебания решетки должны приводить только к перенормировке энергий взаимодействия (и, возможно, к их увеличению в области эффективных прямых взаимодействий). Указанные предположения означают также пренебрежение эффектами, обусловленными различием атомных размеров ионов A и B; однако такие эффекты могут быть существенны, если это различие велико. Тем не менее кажется, что модель должна достаточно хорошо описывать явление упорядочения.

2.3.2 Математические модели

Из трех описанных выше моделей, вероятно, наиболее реалистична модель классического континуального газа. Однако она слишком сложна для математического рассмотрения, за исключением случая малых плотностей, который, в сущности, не может быть полезен при расчете критического состояния. Поэтому большинство вычислений проводятся в еще более упрощенных моделях.

Решеточный газ

В наиболее общей формулировке модели вводится правильная решетка с постоянной δ; предполагается, что молекулы расположены в узлах решетки и что нет узлов, занятых более чем одной молекулой. По существу, это просто означает замену конфигурационных интегралов в статистическом интеграле приближенными римановыми суммами. При этом можно пренебречь любыми ошибками (возможно, кроме случая плотностей, близких к плотной упаковке), если постоянная решетки δ мала по сравнению с расстоянием, на котором заметно меняется парный потенциал. Действительно, после точного расчета для различных одномерных систем можно проверить, что в пределе при $\delta \to 0$ $[\phi(r) = const]$ результаты для модели решеточного газа точно совпадают с результатами для континуальной модели при $\rho > \rho_{max}$.

К сожалению, во всех практических случаях математические трудности при малых δ еще более возрастают. Поэтому мы вынуждены, рассматривать предельный случай, когда действие сил отталкивания сводится просто к запрещению одновременного пребывания двух атомов в одном и том же узле, а силы притяжения обусловлены лишь взаимодействием ближайших соседей, т. е.

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \phi(0) & = & \infty, \\ \phi(\delta) & = & -|\phi_0|, \\ \phi(r) & = & 0, \ r > \delta. \end{array} \right.$$

Искусственность такой модели очевидна. Она не может правильно описать поведение плотных газов; ясно, что нельзя ожидать количественного согласия при сравнении с реальными газами.

Тем не менее эта модель, как мы покажем дальше, математически эквивалентна модели бинарных сплавов [кроме знака $\phi(\delta)$] и приводит к неожиданной точности при расчете явлений в критической точке.

Наконец, упростим модель Гейзенберга, которая во многих отношениях проще модели континуального газа (так, она строго, хотя и асимптотически, описывает низкотемпературные свойства в терминах спиновых волн; можно, кроме того, получить некоторые результаты и в области высоких температур). Однако некоммутативность операторов в модели Гейзенберга приводит к значительным вычислительным трудностям. Поэтому введем следующую модель:

Изинговская модель магнетизма

Для этого заменим изотропное гейзенберговское взаимодействие $\mathbf{S_i} \cdot \mathbf{S_j}$ анизотропным изинговским взаимодействием $\mathbf{S_i^z} \cdot \mathbf{S_j^z}$.

Если поле H параллельно оси z, гамильтониан тривиально диагонализуется и операторы S_l^z можно заменить "квазиклассическими" переменными, введя $2S + 1$ величин S, S—1, ..., —(S—1), —S. В простейшем и чаще всего рассматриваемом случае $S = 1/2$ $S_l^z = \pm 1/2$, что соответствует только двум положениям спинов: "вверх" и "вниз". Как правило, ограничиваются гипотезой о взаимодействии ближайших соседей. Кроме того, если поле не параллельно оси z, проявляются некоммутативные свойства S_i^α.

Одно из наиболее искусственных допущений модели Изинга – ее анизотропность, которая приводит к полному отсутствию спиновых волн при низких температурах. Однако для нас более интересна область высоких температур, близких к критической точке, где можно ожидать, что этот недостаток менее важен (и понятие о спиновых волнах уже неприменимо). С другой стороны, обнаружены некоторые сильно анизотропные магнитные кристаллы (например, антиферромагнитный прозиевоалюминиевый гранат), которые должны хорошо аппроксимироваться моделью Изинга даже при низких температурах.

2.4 Модель Изинга

Модель Изинга представляет собой единственную модель системы взаимодействующих частиц, для которой проведен строгий математический расчет критических индексов. Хотя первоначально эта модель была сформулирована для ферромагнетиков, она пригодна для описания фазового перехода в любой системе, характеризуемой набором переменных, которые связаны с узлами кристаллической решетки, причем на каждом узле соответствующая переменная может принимать только два значения: $+1$ и -1. Обычно такую двузначную переменнью называют "спином", считая, что каждый j-й узел решетки характеризуется переменной S_j либо σ_j.

Конфигурация решетки задается с помощью значений всех N спинов в узлах решетки. – т. о., для решетки из N узлов существует 2^N конфигураций. Предполагается, что энергия взаимодействия зависит только от конфигурации соседних спинов: если их значения одинаковы (оба $+1$ либо оба -1), то данная энергия равна $-U$, если же они различны – то $+U$. Другими словами, взаимодействие стремится сделать все спины одинаковыми. В различных системах такое взаимодействие приводит к спонтанной намагниченности, когда все спины направленны в одном направлении даже при отсутствии внешнего поля; фазовому переходу; конденсации, при которой все молеулы собираются в одной области пространства, оставляя другие области пустыми.

Итак, любая пара соседних узлов решетки вносит вклад в энергию, равный $-U\sigma_i\sigma_{i+1}$, где U может быть как положительной величиной, так и отрицательной. Кроме того, полная энергия системы включает в себя также члены вида μH_i, где μ – магнитный момент, H – внешнее поле. Математически задача сводится к нахождению аналитического выражения для статсуммы,

$$Z = \sum E^{-E/kT},$$

где суммирование выполняется по всем возможным конфигурациям, а энергия

$$E = -\sum_{i,\ j,\ i\neq j} U\sigma_i\sigma_j + \mu H \sum_i \sigma_i.$$

Зная статсумму, можно стандартными термодинамическими способами вычислить все т/д функции и определить наличие фазового перехода в системе.

Ленц и Изинг

Хотя данную модель обычно называют моделью Изинга, она впервые была предложена его научным руководителем Вильгельмом Ленцем в 1920 году. Интересно, что имя Ленца никогда впоследствии не упоминалось в связи с предложенной им моделью, и даже его коллеги по Гамбургскому университету не отдавали себе отчет о значимости внесенного им вклада; сам же Ленц никогда не пытался заявлять о своих правах на предложенную им модель.

Рис. 2.1: Вильгельм Ленц

Ленц предположил, что дипольные атомы могут свободно вращаться вокруг некоторой фиксированной точки – узла решетки. Чтобы понять физический смысл этого предположения, проследуем суждениям Ленца:

“с точки зрения квантовой механики некоторые ориентации диполя однозначно являются различными, и среди них $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi$. Учитывая свойства кристалла можно придти к выводу, что в промежуточных ориентациях энергия больше, нежели в крайних, поэтому кристалл стремится занять одно из крайних положений. Т. о., с учетом внешнего поля, для простоты направленного вдоль направления $\alpha = 0$, получаем, что

$$\bar{\mu} = \mu(e^a - e^{-a})/(e^a + e^{-a}),$$

где $a = \mu H/kT$, что при малых a дает

$$\bar{\mu} = \mu^2 H/kT.$$

В ферромагнитных системах существует спонтанная намагниченность, которую можно получить, если предположить, что в ферромагнетиках энергия взаимодействия между соседними атомами различна при 0– и π–ориентации. Я полагаю, что в рамках данной модели удастся объяснить ферромагнетики."

В 1920 году Ленц работал в университете Ростока, но в следующем году был приглашен в гамбургский университет на должность профессора, где одним из его первых учеников и стал Эрнст Изинг. В качестве биографической информации об Э. Изинге приведем его собственную автобиографию, написанную для защиты диссертации:

"Я, Эрнст Изинг, родился 10 мая 1900 г. в Кёльне. Вскоре мои родители переехали в Bochum, Westfall, где я пошел в школу в 1907 г. и закончил ее в 1918 г. После службы в армии начал обучение математике и физике в университете Гёттингема в 1919. Затем обучался в Бонне, после – в Гамбурге. Затем (в 1922 г.) стал заниматься ферромагнетизмом в Гамбурге под руководством профессора В. Ленца."

Рис. 2.2: Эрнст Изинг

В своей диссертации (впоследствии опубликованной в 1925 году в виде небольшой статьи) Изинг вычислили статсумму вышеприведенной модели в одномерном случае [5]. Оказалось, что в данном случае фазовый переход невозможен ни при какой температуре. Этому было найдено физическое объяснение, но Изинг не заметил, что приведенные им аргументы работают только в случае одномерной цепочки. Приведем одно из писем Изинга, в котором он описывает свою дальнейшую биографию:

"В то время считалось, что атомы и молекулы магнетиков обладают магнитным моментом и поэтому могут находиться только в определенных положениях. Мы предположили, что поле этих диполей убывает достаточно быстро, поэтому в первом приближении достаточно учитывать только взаимодействие соседей. Мы обсуждали эту задачу с Вильгельмом Ленцем и Вольфгангом Паули, преподававшем в то время в Гамбурге, и было некоторое разочарование в связи с тем, что данная модель не описывает наблюдаемых ферромагнитных свойств. Я не знаю ни о какой реакции на мою статью в Европе, разве что Гайзенберг упомянул ее однажды в одной из своих работ. Только переехав в США в 1947 я узнал, что мои идеи получили распространение.

После защиты докторской диссертации я работал в Берлине в General Electric Company, в какой-то момент преподавал в университете. После прихода Гитлера к власти в 1933 я был отстранен от публичной деятельности и в течении четырех лет являлся главой частной еврейской школы вблизи Потсдама. Покинув Германию в 1939, я не смог сразу добраться до США и провел военные годы в Люксембурге, полностью изолированным от общественной и научной жизни. По прибытии в США я год преподавал в State Teachers College in Minot, а с 1949 года в университет Бредли (штат Иллинойс)".

Изинг отмечает упоминание Гейзенбергом своей работы. Гейзенберг, в свою очередь, заметил, что "Изинг показал, что наличие только лишь взаимодействия между двумя соседними узлами решетки недостаточно для описания ферромагнетика."

Вероятно, учитывая отказ самого Изинга от данной модели, мы бы никогда про нее ничего больше не услышали, если бы она не описывала столь многие области физики. Одной из них является упорядочивание примесей – Тамман в 1919 предположил, что атомы в примесях могут находиться в определенном упорядочении, и некоторое количество работ было посвящено разработке идеи о том, что упорядочивание примеси происходит благодаря минимуму потенциальной энергии в таком состоянии. В 1928 Горский построил теорию, главным предположением которой являлось предположение о том, что работа, необходимая для того, чтобы сменить "упорядоченное" состояние атома на "неупорядоченное" пропорциональна уже существующей степени упорядоченности. Брегг и Вильямс развили эти идеи в 1934, и данный подход стал известен как "приближение Брегга-Вильямса". Эти работы отличаются от модели Ленца–Изинга тем, что энергия каждой конфигурации зависит только от усредненной степени упорядоченности всей системы, а не от конфигураций соседних атомов.

В 1935 Ганс Бете показал, что теория Брегга-Вильямса может быть усовершенствована, если учесть взаимодействие между двумя соседними атомами. Он осуществил свою идею, введя комбинаторный множитель, зависящий от конфигурации спинов вокруг центра. В том же году Гуггенгейм разработал теорию жидкости (названную квазихимической теорией), в которой также учел взаимодействие между ближайшими соседями. В дальнейшем этот метод был развит Рушбруком с помощью идей, похожих на идеи Бете. В результате Гуггенгейм показал, что квазихимическая теория полностью эквивалентна теории Бете, но в некоторых случаях более удобна для расчетов, и в 1940 году вместе с Фоулером опубликовал статью с полной формулировкой постулатов квазихимической теории и примером расчета систем с дальним порядком.

Попытки найти точное решение

В 1936 году Р. Пайерльс опубликовал работу, в которой указывал на идентичность модели Изинга для ферромагнетика и модели Бете для упорядоченности примесей. Пайерльс привел простой аргумент в пользу того, что при достаточно низких температурах в двух и трех измерениях модель Изинга должна описывать фазовый переход (спонтанную намагниченность). Он заметил, что любая конфигурация (+) или (−) спинов на решетке отвечает некоторой "границе" между областями (+)–спинов и (−)–спинов. Если бы удалось доказать, что при достаточно низких температурах область (+)–спинов занимает небольшую часть от всей поверхности, это означало бы, что все остальное приходится на область (−)–спинов, что соответствовало бы наличию намагниченности. Доказательство Пайерльса не было строгим из-за содержания некоего некорректного шага, что было устранено впоследствии Фишером.

Следующий шаг был сделан Кирквудом, разработавшим в 1938 году метод разложения статсуммы по обратным степеням температуры. Т. к. лишь небольшое число членов удалсь вычислить, метод в реалии оказался идентичным приближению Бете, но временами более удобным и менее громоздким. В 1939 году Бете и Кирквуд опубликовали совместную статью, сравнивающую оба метода, и вычислили следующий член в разложении Кирквуда. Затем было вычислено еще несколько членов.

Первый точный количественный результат для двумерной модели Изинга был получен Крамерсом и Ванье в 1941 году; в своей работе они использовали высоко- и низкотемпературное разложение статсуммы. Было показано, что статсумма может быть представлена в виде максимального собственного значения некой матрицы (называемой трансфер-матрицей, подробнее об этом см. раздел 2.5). В результате Крамерс и Ванье разработали метод, позволяющий получить точное решение в асимптотике большого числа узлов – при условии, что технически возможен анализ матриц больших размеров.

В то же время другими авторами было получено еще несколько точных, но неполных результатов для модели Изинга: используя метод Бете, Зернике получил нелинейное дифференциальное уравнение на корреляционную функцию; Ашкин и Лэмб получили точное низкотемпературное разложение для корреляционной функции на двумерной решетке. В Японии Кубо разрабатывал матричный подход и показал, что фазовый переход в двух- или трехмерной системе связан с вырождением максимального собственного значения трансфер-матрицы, но детальных вычислений (кроме одномерного случая) не провел.

Точное решение Онзагера

В 1942 году на конференции New York Academy of Science Онзагер объявил о своем точном решении двумерной модели Изинга в отсутствии внешнего поля. Детали были опубликованы лишь два года спустя [6]. Онзагер использовал метод, сходный с Крамером и Ванье, за исключением того, что вместо огромных матриц, отвечающих явному виду операторов, исследовались сами операторы. Впоследствии, используя понятия алгебры Ли и спиноров, этот метод был упрощен Кауфман и Ньюилом и Монтроллом. В результате было получено, что для решетки $n \times m$ статсумма имеет вид

$$\lim_{n,m\to\infty} \frac{\log Z}{mn} = \log 2 + \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi d\omega \log(\cosh 2K \cosh 2K' - \sinh 2K \cos\omega - \sinh 2K' \cos\omega),$$

где $K = U/kT$, $K' = U'/kT$, U и U' – различные энергии взаимодействия в горизонтальном и вертикальном направлениях решетки.

Позже Онзагер вычислил также и спонтанную намагниченность, представив свою формулу для нее 23 августа 1948 года в Корнелльском университете на конференции по фазовым переходам, но деталей ее получения так и не опубликовал.

Основываясь на этом результате, можно вычислить статсумму и прочие свойства и для других двумерных моделей, однако никаких принципиально новых результатов получено не было – похоже не то, что все двумерные решетки обладают приблизительно сходными свойствами, во всяком случает те, что имеют взаимодействие между ближайшими спинами. Также до сих пор не решена проблема вычисления статсуммы во внешнем магнитном поле.

Как уже упоминалось ранее, критическое поведение трехмерной модели Изинга считается сейчас достаточно хорошо известным благодаря разработке эффективных методов экстраполяции высоко- и низкотемпературных разложений. На этом пути удалось получить достаточно надежные и точные оценки критических температур и индексов для различных пространственных решеток. Результаты численных расчетов в трехмерной модели Изинга сыграли очень важную роль. Во-первых, они наглядно подтвердили идею универсальности: для разных решеток (простая кубическая, объемноцентрированная, гранецентрированная и др.) полученные значения критических температур оказались существенно различными, а критические индексы – одинаковыми, но при этом иными, чем в двумерной модели. Во-вторых, именно анализ полученных значений индексов подсказал идею критического скейлинга.

Стоит отметить, что в 2010 году премия Филдса присуждена Станиславу Смирнову “За доказательство конформной инвариантности двумерной перколяции и модели Изинга в статистической физике”.

2.5 Матричный метод

Рассмотрим более подробно матричный метод вычисления статсуммы, т. к. он часто используется не только для модели Изинга, но и для многих других решеточных моделей (в частности, т. н. шестивершинная и восьмивершинная модели, см. [7]). Рассмотрим $N \times$ M двумерную решетку, состоящую из M строк и N столбцов, в узлах которой располагаются «спины» $\sigma = \pm 1$. Энергия взаимодействия при заданной конфигурации спинов

$$E = -J \sum {}^{*} \sigma_p \sigma_q,$$

звездочка при знаке суммирования означает, что в сумму входят лишь те узлы решетки P и Q, которые являются ближайшими соседями. Кроме того, предполагается равенство энергии взаимодействия ближайших соседей по вертикали и по горизонтали ($J = J'$), а также $J > 0$, т. е. взаимодействие носит ферромагнитный характер, так что в основном состоянии все спины направлены одинаково: $\sigma = -1$ или $\sigma = +1$.

Статистическая сумма

$$Z_{M,N} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-E/kT},$$

причем здесь и в дальнейшем символ $\{\sigma\}$ означает суммирование по всем $2^{M \cdot N}$ возможным конфигурациям.

Для свободной энергии ψ, отнесенной к одному спину, получаем после перехода к термодинамическому пределу

$$-\frac{\psi}{kT} = \lim_{M,N\to\infty} (MN)^{-1} \ln Z_{N,M}. \tag{2.1}$$

Крамерс и Ванье свели задачу расчета величины $Z_{N,M}$ к определению собственных значений $2^M \times 2^N$ матрицы перехода L:

$$L(\sigma,\ \sigma') = \exp\left(\frac{\nu}{2} \sum_{k=1}^{M} \sigma_k \sigma_{k+1}\right) \cdot \exp\left(\nu \sum_{k=1}^{M} \sigma_k \sigma'_{k+1}\right) \cdot \exp\left(\frac{\nu}{2} \sum_{k=1}^{M} \sigma'_k \sigma'_{k+1}\right),$$

где $\nu = J/kT$.

Если $\{\sigma\} = \{\sigma_1,\ \sigma_2,\ ...,\ \sigma_M\}$ представляет собой совокупность столбцов в решетке Изинга и на решетку наложены тороидальные граничные условия (т. е. в каждом столбце $\sigma_{M+1} = \sigma_1$, а N-й столбец совпадает с первым), то можно показать, что

$$Z_{N,\ M} = \sum_{\sigma} L^N(\sigma,\ \sigma') = Tr(L^N) = \sum_{j=1}^{2^M} \Lambda_j^N, \tag{2.2}$$

где $\Lambda_{max} = \Lambda_1 > \Lambda_2 > ... > \Lambda_{2^M}$ – собственные значения матрицы L. Если устремить N к бесконечности, из (2.2) сразу следует, что

$$\lim_{N\to\infty} N^{-1} \ln Z_{N,\ M} = \ln \Lambda_1,$$

и поэтому, согласно (2.1),

$$-\frac{\psi}{kT} = \lim_{M\to\infty} M^{-1} \ln \Lambda_1.$$

Расчет величины Λ_{max} был впервые выполнен Онзагером. Перечислим здесь основные свойства Λ_{max} :

1. При конечном M величина Λ_{max} является аналитической функцией ν, т. е. фазовый переход в решетке, ограниченной в одном измерении, невозможен.

2. При $M \to \infty$ для температур T, меньших некоторой критической температуры T_c, величина Λ_{max} становится асимптотически вырожденной; точнее говоря, при $T > T_c$ матрица L имеет невырожденный спектр, а интервалы между величинами $(1/M)\ln(\Lambda_j)$ имеют порядок $1/M$. Ниже T_c существуют два таких же спектра с теми же интервалами для величин $(1/M)\ln(\Lambda_j)$, но эти спектры сдвинуты друг относительно друга на величину порядка e^{-cM}, где c – положительная константа.

Ашкин и Лэмб впервые заметили, что асимптотическое вырождение связано с существованием дальнего порядка. Таким образом, можно сказать, что асимптотическое вырождение наибольшего собственного значения матрицы перехода лежит в основе математического механизма фазового перехода в двумерной решетке Изинга. Можно показать, что такой механизм носит весьма общий характер: есть надежда, что для каждого подобного гамильтониана удастся построить линейный оператор, наибольшее собственное значение которого дает свободную энергию системы, а вырождение этого собственного значения можно связать с фазовым переходом.

Глава 3

Заключение

Фазовые переходы являются типичной задачей проблемы многих тел, в которой определяющую роль играют “кооперативные явления” (появление дальних корреляций), т. е. поведение энтропии, а не энергии. Главную роль играет не конкретный закон взаимодействия частиц, а статистико-механическая природа системы. Поэтому решение этой проблемы может оказаться одновременно решением других многочастичных задач, например в ядерной физике.

Фазовые переходы в различных физических системах являются предметом многочисленных исследований; в настоящее время уже накоплен достаточно большой экспериментальный материал, построено немало приближенных теорий. В другой области физики такое обилие информации, вероятно, удовлетворило бы исследователей, но в физике фазовых переходов дело обстоит иначе. Дело в том, что в критической точке термодинамические величины (например, производные от свободной энергии в функции от температуры и объема), по-видимому, имеют математическую особенность, поэтому для такой “особой точки” всякая приближенная теория может оказаться ошибочной.

Хотя в теоретической физике задачи, поддающиеся точному решению — редкость, в данном случае нахождение точного решения представляется необходимым. Однако надежда найти такое решение, может быть, и не возникла, если бы в 1944 г. не появилась статья Онзагера, который дал точное решение для двумерной модели Изинга. Эта работа Онзагера – одна из наиболее оригинальных и удивительных работ нашего времени. Успешное решение столь сложной задачи вдохновляет исследователей на поиски точного решения как для трехмерной модели Изинга, так и для более общих моделей.

Особые свойства вещества вблизи критических точек способны поразить и неспециалиста. Помимо широко известных явлений сверхпроводимости и сверхтекучести, упомянем лишь о некоторых экспериментальных фактах для критических точек жидкостей: бесконечное возрастание теплоемкостей при постоянном давлении и постоянном объеме; вытекающее из этого уменьшение не только изотермической, но и адиабатической скорости звука; практически полное прекращение диффузии вблизи критических точек бинарных смесей; значительное сужение линии рэлеевского рассеяния и т. д. Довольно очевидно, что области технического применения этих и других свойств вещества вблизи критических точек будут все более расширяться.

Литература

[1] Васильев А.Н.: Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике, Санкт-Петербург, ПИЯФ (1998)

[2] Фишер М.: Природа критического состояния, М., Мир (1968)

[3] Дайсон Ф., Монтролл Э., Кац М., Фишер М.: Устойчивость и фазовые переходы, М., Мир (1973)

[4] Stephen G. Brush: History of the Lenz — Ising Model. Reviews of modern Physics **39**, 883 (1967)

[5] Ising E.: Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. Zeitschrift f*ü*r Physik **31**, 253 (1925)

[6] Onsager L.: Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. Physical Review **65**, 117 (1944)

[7] Бэкстер Р.: Точно решаемые модели в статистической механике, М., Мир (1985)